

MSC 81V45

# РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ КОНА-ШЕМА ДЛЯ МОЛЕКУЛЫ УГЛЕРОДА МЕТОДОМ ОПОРНОЙ ФУНКЦИИ

А.В. Береговой, А.Г. Шкловский

Белгородский государственный университет,  
ул. Победы, 85, Белгород, 308015, Россия, e-mail: [Shklovsky@bsu.edu.ru](mailto:Shklovsky@bsu.edu.ru)

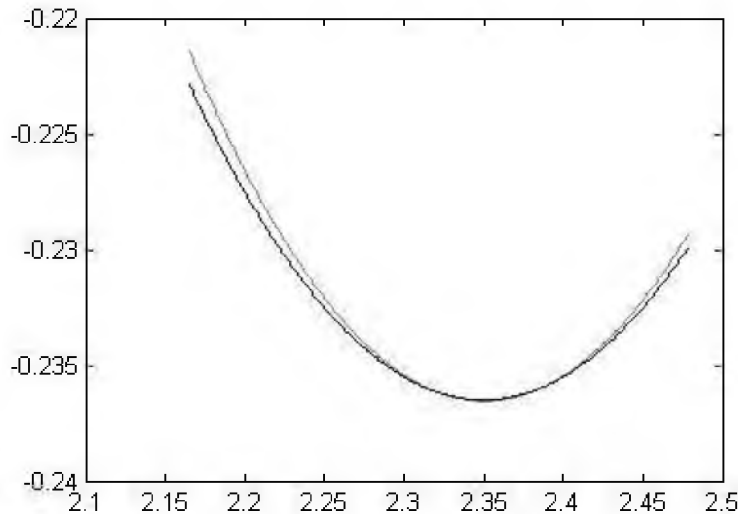
Энергия связи  $E_{CB}$  молекулы углерода вычисляется по формуле:

$$E_{CB} = E_{cc}(|\vec{a}|) + \frac{\omega_0}{2} - 2E_c. \quad (1)$$

где  $E_c$  – полная энергия электронов в атоме углерода, а  $E_{cc}(|\vec{a}|)$  – полная энергия электронов в молекуле углерода для различных расстояний между ядрами:

$$E_{cc}(|\vec{a}|) = \sum_{j=1}^{N_{em}} E_j - \int (V(\vec{r}) - V_c(\vec{r}))n(\vec{r})d\vec{r} + E_{har}[n] + E_{xc}[n] + \frac{Z_c^2}{|\vec{a}|}. \quad (2)$$

Здесь  $E_j$  – энергия  $j$ -го электронного уровня, полученная в результате решения уравнения Кона-Шема,  $V(\vec{r})$  – модифицированный локальный потенциал Кона-Шема для молекулы углерода [1],  $V_c(\vec{r})$  – потенциал притяжения электрона к ядрам,  $E_{har}[n]$  – энергия Хартри,  $E_{xc}[n]$  – обменно-корреляционная энергия в приближении МЛП [1],  $Z_c$  – заряд ядра,  $N_{em}$  – количество электронов в молекуле,  $n(\vec{r})$  – плотность электронов в молекуле.



На графике зависимости  $E_{cc}(|\vec{a}|) - 2E_c$  есть минимум. Вблизи от этого минимума график можно аппроксимировать параболой:  $E_{ccap}(|\vec{a}|) = -0,2365 + 0,39888 \cdot (|\vec{a}| - 2,35)^2$

Хотя мы и описывали ядра атомов углерода в молекуле в адиабатическом приближении, как покоящиеся классические частицы, на самом деле они участвуют в нулевых колебаниях. В качестве эффективной массы выступает  $M_{ef} = 0,5M_c$ , где  $M_c = 11107,4$  - масса атома углерода. Энергия нулевых колебаний в атомной системе единиц  $\omega_0$  будет иметь вид:  $\omega_0 = \sqrt{k_1/M_{ef}} \cdot 27,211396 = 0,2306 \text{ эВ}$ .

Этот результат находится в хорошем согласии с экспериментом. Видно, что минимум энергии достигается при  $|\vec{a}| = 2,35$  радиуса Бора, что хорошо совпадает с экспериментом. Экспериментальное значение энергии связи примерно 6.3 эВ. Это же значение, вычисленное по формуле (1) - 6.32 эВ, расчет проводился методом опорной функции с точностью до сотых долей эВ.

### Литература

1. Береговой А.В., Шкловский А.Г. Решение уравнения Кона-Шема для цилиндрических атомов методом опорной функции // Научные ведомости БелГУ. Серия Математика. Физика. – 2013